

# リファレンスガイダンス

## 第 R.6 章: QSAR と化学品のグループ化

### 改訂履歴

版	備考	原文の更新日	JETOC 資料*
第 1 版	初版	2008 年 5 月	<a href="#">特集号 No.94</a> の第 6 章

\*JETOC 発行資料の番号をクリックすると資料購入ページにリンクします。

### 第 1 版の構成内容 (特集号 No.94 の第 6 章)

#### 目次

R.6	QSAR と物質のグループ化に関する手引 .....	9
R.6.1	QSAR に関する手引 .....	9
R.6.1.1	(Q) SAR 概念の説明 .....	9
R.6.1.2	(Q) SAR およびグループ化法を用いるための REACH の枠組み .....	10
R.6.1.3	(Q) SAR の妥当性、適用範囲および容認 .....	11
R.6.1.3.1	(Q) SAR バリデーションのための OECD 原則 .....	13
R.6.1.3.2	(Q) SAR モデルの妥当性 .....	15
R.6.1.3.3	(Q) SAR 予測の信頼性 .....	15
R.6.1.3.4	(Q) SAR 予測の適切性 .....	16
R.6.1.4	QSAR の規制目的での使用 - 最新の経験 .....	17
R.6.1.4.1	リスクアセスメントのための (Q) SAR の使用 .....	17
R.6.1.4.2	分類・表示のための (Q) SAR の使用 .....	19
R.6.1.4.3	PBT (vPvB) アセスメントのための (Q) SAR の使用 .....	20
R.6.1.5	QSAR の規制目的での使用 - REACH の枠組み .....	21
R.6.1.5.1	(Q) SAR 結果の適切性を評価するステップ .....	21
R.6.1.5.2	モデルの妥当性の評価 .....	22
R.6.1.5.3	個々のモデルの予測の信頼性のアセスメント .....	26
R.6.1.5.4	適切性のアセスメント .....	28
R.6.1.5.5	REACH 下での (Q) SAR データの容認 .....	30
R.6.1.6	QSAR 報告書式 .....	30
R.6.1.6.1	(Q) SAR についての適切な文書化の必要性 .....	30
R.6.1.6.2	異なるタイプの QSAR 報告書式 (QRF) .....	31
R.6.1.6.3	(Q) SAR モデル報告書式 (QMRF) .....	32

R.6.1.6.4	(Q) SAR 予測報告書式 (QPRF) .....	33
R.6.1.6.5	結論.....	33
R.6.1.7	非試験データの使用に向けた段階的アプローチ .....	34
R.6.1.7.1	コンピュータツールによる規制要件への適合 .....	34
R.6.1.7.2	非試験データの作成と使用のために構築されたワークフロー.....	34
R.6.1.7.3	ステップ 0 - 情報収集.....	36
R.6.1.7.4	ステップ 1 - 反応性、取り込みおよび運命の予備的分析.....	39
R.6.1.7.5	ステップ 2 - 関心対象のエンドポイントのための分類のスキームの使用 .....	40
R.6.1.7.6	ステップ 3 - 関心対象のエンドポイントについての警告部分構造の探索 .....	40
R.6.1.7.7	ステップ 4 - 反応性、取り込み、毒性および運命の予期される種類についての 予備的アセスメント.....	40
R.6.1.7.8	ステップ 5 - 読み取り.....	41
R.6.1.7.9	ステップ 6 - (Q) SAR.....	43
R.6.1.7.10	ステップ 7 - 全体的アセスメント.....	44
R.6.1.8	(Q) SAR を適用するためのコンピュータツール.....	44
R.6.1.8.1	分子記述子.....	45
R.6.1.8.2	CEFIC により開発されたコンピュータツール.....	48
R.6.1.8.3	ECB が開発・実装したコンピュータツール.....	48
R.6.1.8.4	OECD により開発中のコンピュータツール.....	50
R.6.1.8.5	US-EPA により開発されたコンピュータツール.....	51
R.6.1.8.6	代謝のアセスメントにおいて手助けとなるツールおよびデータベース .....	56
R.6.1.9	QSAR モデル報告書式 (QMRF) .....	59
R.6.1.9.1	QMRF-第 1.216 版.....	59
R.6.1.9.2	エンドポイント分類.....	65
R.6.1.10	QSAR 予想報告書式 (QPRF) .....	67
R.6.1.10.1	QPRF- 第 1.118 版.....	67
R.6.1.11	(Q) SAR に関する手引の参考文献.....	71
R.6.2	化学品のグループ化に関する手引.....	76
R.6.2.1	化学品カテゴリーアプローチの説明.....	76
R.6.2.1.1	化学品カテゴリーアプローチの有益性.....	77
R.6.2.1.2	関連する概念の説明.....	79
R.6.2.1.3	化学品カテゴリーのメカニズムの原理.....	84
R.6.2.1.4	化学品カテゴリーアプローチの適用.....	85
R.6.2.1.5	化学品カテゴリーのローバスト性.....	86
R.6.2.1.6	カテゴリーと QSAR の間の相互依存性.....	86
R.6.2.2	化学品カテゴリーにおけるデータギャップを補填するアプローチ.....	89

R.6.2.2.1	読み取り .....	90
R.6.2.2.2	内部モデルに基づく傾向解析およびコンピュータを利用した方法 .....	99
R.6.2.2.3	外部モデルに基づくコンピュータを利用した方法 .....	101
R.6.2.2.4	証拠の重みの考慮事項 .....	102
R.6.2.3	アナログアプローチを実施するための段階的手順に関する手引 .....	102
R.6.2.3.1	アナログアプローチの範囲内で読み取りを適用するための段階的手順 .....	104
R.6.2.4	カテゴリーを作成する段階的手順に関する一般的手引 .....	109
R.6.2.4.1	化学品カテゴリーの形成に向けての段階的手順 .....	110
R.6.2.4.2	化学品カテゴリーのメンバーについての一式文書の入念な作成のための IT ツール .....	120
R.6.2.5	特定の種類のカテゴリーに関する手引き .....	121
R.6.2.5.1	鎖長 .....	121
R.6.2.5.2	代謝経路 .....	122
R.6.2.5.3	化学反応産物および多成分物質 .....	125
R.6.2.5.4	異性体 .....	126
R.6.2.5.5	複合物質 (UVCB) .....	128
R.6.2.5.6	金属、金属化合物およびその他の無機化合物 .....	133
R.6.2.6	アナログとカテゴリー評価のための報告様式 .....	139
R.6.2.6.1	アナログアプローチの報告様式 .....	139
R.6.2.6.2	化学品カテゴリーの報告様式 .....	142
R.6.2.7	ホスホン酸化合物およびアルカリ金属塩を用いたケーススタディ .....	144
R.6.2.8	化学品のグループ化に関する手引の参考文献 .....	151

表

表 R.6-1	分子記述子の計算に使用するために一般的に使用される ソフトウェアパッケージ .....	47
表 R.6-2	類縁物質検索のために選択されたインターネットに基づくツール .....	108
表 R.6-3	データマトリックス、アナログアプローチ .....	141
表 R.6-4	データマトリックス、化学品カテゴリー .....	143
表 R.6-5	カテゴリーメンバー .....	146
表 R.6-6	HEDP の不純物プロフィール .....	147
表 R.6-7	物理化学的性質および環境運命 .....	148
表 R.6-8	生態毒性エンドポイント .....	149

図

図 R.6-1 :	(Q) SAR の妥当性、信頼性、適切性、規制上の適合性の相互関係の概念 .....	16
-----------	--	----

図 R.6-2 :	化学品の規制アセスメントにおける非試験アプローチの使用のための フローチャート .....	36
図 R.6-3 :	化学品カテゴリーおよびデータのギャップ補填のための一部のアプローチの 図式的表示.....	81
図 R.6-4 :	QSAR/QAAR のグラフィック表示 .....	87
図 R.6-5 :	アナログアプローチへの段階的手順.....	109
図 R.6-6 :	カテゴリー作成に向けた段階的手順.....	111